V.3 Drehungen

Jetzt werden dreidimensionale Drehungen und ihre Wirkung betrachtet. Wenn $\vec{n}$ der Einheitsvektor entlang der Drehachse und α der Winkel der Drehung sind, kann wird die Transformation

$$\vec{r} \to \vec{r}\,' = \mathscr{R}(\vec{n},\alpha)\vec{r} \tag{V.27a}$$

des Ortsvektors durch

$$\mathscr{R}(\vec{n},\alpha)\vec{r} \equiv (\cos\alpha)\vec{r} + (1-\cos\alpha)(\vec{n}\cdot\vec{r})\vec{n} + (\sin\alpha)\vec{n}\times\vec{r} \tag{V.27b}$$

gegeben. Für eine infinitesimale Drehung mit Winkel $|\delta\alpha| \ll 1$ wird dies zu

$$\mathscr{R}(\vec{n},\delta\alpha) = \vec{r} + \delta\alpha\,\vec{n}\times\vec{r} + \mathcal{O}(\delta\alpha^2). \tag{V.27c}$$

V.3.1 Operation auf Vektoren von $\mathbb{R}^3$

Seien x_j, x'_j und n_j mit $j \in \{1,2,3\}$ die jeweiligen kartesischen Koordinaten von $\vec{r}$, $\vec{r}\,'$ und $\vec{n}$ in einem festen Bezugssystem. Damit wird die infinitesimale Drehung (V.27c) zu

$$x'_i = x_i + \delta\alpha \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} n_j x_k + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \quad \text{für} \quad i=1,2,3$$

mit dem völlig antisymmetrischen Levi-Civita-Symbol ϵ_{ijk}. Dies lässt sich auch in der Form

$$x'_i = \sum_{k=1}^{3}\left(\delta_{ik} + \delta\alpha\sum_{j=1}^{3}\epsilon_{ijk}n_j\right)x_k + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \quad \text{für} \quad i=1,2,3$$

umschreiben, d.h. nach Einführung einiger auf erster Sicht beliebigen numerischen Koeffizienten[32]

$$x'_i = \sum_{k=1}^{3}\left[\delta_{ik} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\sum_{j=1}^{3}(\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk})n_j\right]x_k + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \quad \text{für} \quad i=1,2,3. \tag{V.28}$$

Seien nun Σ_1, Σ_2, Σ_3 drei komplexe 3×3-Matrizen mit den jeweiligen Matrixelementen

$$(\Sigma_j)_{ik} \equiv \mathrm{i}\epsilon_{ijk} \quad \text{für} \quad i,j,k=1,2,3, \tag{V.29a}$$

d.h. im Matrixform

$$\Sigma_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \Sigma_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \Sigma_3 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{V.29b}$$

Mit deren Hilfe und den kartesischen Komponenten (n_1,n_2,n_3) des Einheitsvektors $\vec{n}$ definiert man eine neue 3×3-Matrix

$$\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma}) \equiv n_1\hbar\Sigma_1 + n_2\hbar\Sigma_2 + n_3\hbar\Sigma_3 = \mathrm{i}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{V.30}$$

Dabei soll $\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma})$ nur als eine kürzere Notation für die Summe verstanden werden. Unter Nutzung dieser Matrix, deren Elemente mit $\left[\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma})\right]_{ik}$ bezeichnet werden, wird Gl. (V.28) zu

$$x'_i = \sum_{k=1}^{3}\left(\delta_{ik} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\left[\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma})\right]_{ik}\right)x_k + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \quad \text{für} \quad i=1,2,3.$$

[32] Dabei muss man die imaginäre Einheit i nicht mit dem Index $i \in \{1,2,3\}$ verwechseln!

Dabei ist δ_{ik} das ik-Element der 3×3-Identitätsmatrix $\mathbb{1}_3$, so dass diese drei Gleichungen zwischen den Koordinaten x'_i und x_k gemeinsam die vektorielle Gleichung

$$\vec{r}\,' = \left[\mathbb{1}_3 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\,\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma})\right]\vec{r} + \mathcal{O}(\delta\alpha^2) \tag{V.31}$$

darstellen. Da andererseits die Gl. (V.27a) hier $\vec{r} \to \vec{r}\,' = \mathscr{R}(\vec{n},\delta\alpha)\vec{r}$ lautet, gilt für die Form der infinitesimalen Drehung im Ortsraum $\mathbb{R}^3$

$$\mathscr{R}(\vec{n},\delta\alpha) \simeq \mathbb{1}_3 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\,\vec{n}\cdot(\hbar\vec{\Sigma}). \tag{V.32}$$

Bemerkungen:

∗ Die explizite Form (V.29b) der Matrizen Σ_j zeigt, dass sie alle drei hermitesch sind: $\Sigma_j^\dagger = \Sigma_j$ für $j = 1,2,3$. Das gleiche gilt natürlich auch für die Matrizen $\hbar\Sigma_j$.

∗ Ausgehend von Gl. (V.29b) kann man auch die Kommutatoren zweier Matrizen Σ_i, Σ_j berechnen:

$$[\Sigma_1,\Sigma_2] = \mathrm{i}\Sigma_3 \quad,\quad [\Sigma_2,\Sigma_3] = \mathrm{i}\Sigma_1 \quad,\quad [\Sigma_3,\Sigma_1] = \mathrm{i}\Sigma_2, \tag{V.33a}$$

d.h. noch, da jede Matrix offensichtlich mit sich selbst kommutiert,

$$[\Sigma_i,\Sigma_j] = \sum_{k=1}^{3}\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\Sigma_k. \tag{V.33b}$$

Äquivalent gilt die Vertauschungsrelation

$$[\hbar\Sigma_i,\hbar\Sigma_j] = \sum_{k=1}^{3}\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\,\hbar\Sigma_k. \tag{V.34}$$

V.3.2 Operation auf Wellenfunktionen

Seien $\psi(\vec{r}) \equiv \langle\vec{r}\,|\psi\rangle$ und $\psi'(\vec{r}\,') \equiv \langle\vec{r}\,'|\psi'\rangle$ die „originelle" und „gedrehte" Wellenfunktionen eines Systems. Es gilt

$$\psi'(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r}) = \psi\big(\mathscr{R}(\vec{n},\alpha)^{-1}\vec{r}\,'\big) = \psi\big(\mathscr{R}(\vec{n},-\alpha)\vec{r}\,'\big) \quad \forall\vec{r}\,'\in\mathbb{R}^3, \tag{V.35}$$

wobei die Form der inversen Drehung benutzt wurde. Im Fall einer infinitesimalen Drehung (V.27c) gibt eine Taylor-Entwicklung

$$\psi\big(\mathscr{R}(\vec{n},-\delta\alpha)\vec{r}\,'\big) \simeq \psi(\vec{r}\,' - \delta\alpha\,\vec{n}\times\vec{r}\,') \simeq \psi(\vec{r}\,') - \delta\alpha(\vec{n}\times\vec{r}\,')\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,'),$$

wobei die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\delta\alpha^2)$ nicht geschrieben wurden. Zum anderen lautet Gl. (V.3) $\psi'(\vec{r}\,') = \hat{\mathcal{U}}(\vec{n},\delta\alpha)\psi(\vec{r}\,')$, wobei $\hat{\mathcal{U}}(\vec{n},\delta\alpha)$ den unitären Operator bezeichnet, der die Wirkung der Drehung auf quadratintegrablen Funktionen auf $\mathbb{R}^3$ darstellt. Zusammen ergibt sich daher

$$\hat{\mathcal{U}}(\vec{n},\delta\alpha) = \hat{\mathbb{1}} - \delta\alpha(\vec{n}\times\vec{r}\,')\cdot\vec{\nabla}.$$

Unter Nutzung der Invarianz des Spatprodukts unter zyklischen Permutationen ergibt sich

$$\hat{\mathcal{U}}(\vec{n},\delta\alpha) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\,\vec{n}\cdot\big[\vec{r}\,'\times\big(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\big)\big], \tag{V.36}$$

wobei alle Operatoren auf Funktionen $\psi\in L^2(\mathbb{R}^3)$ wirken.

Bahndrehimpulsoperator

Der *Bahndrehimpulsoperator* für ein Ein-Teilchen-System wird gemäß

$$\boxed{\hat{\vec{L}} \equiv \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}} \tag{V.37a}$$

definiert, d.h. komponentenweise

$$\hat{L}_x \equiv \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad , \quad \hat{L}_y \equiv \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad , \quad \hat{L}_z \equiv \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{V.37b}$$

oder noch

$$\hat{L}_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_j \quad \text{für } i = 1,2,3. \tag{V.37c}$$

Dann lautet dessen Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{L}} \rightsquigarrow \vec{r} \times \left(-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\right), \tag{V.38}$$

so dass der unitäre Operator (V.39) als

$$\hat{\mathcal{U}}(\vec{n}, \delta\alpha) = \hat{\mathbb{1}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\alpha\,\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}} \tag{V.39}$$

geschrieben werden kann. Das heißt, dass die drei Operatoren $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ die Generatoren der Drehungen für die Wellenfunktionen sind.

Bemerkung: In den Gl. (V.37b) oder (V.37c) ist die Ordnung der Operatoren $\hat{x}_j$ und $\hat{p}_k$ unwichtig, weil sie wegen $j \neq k$ miteinander kommutieren.

Ausgehend von der Definition (V.37) des Bahndrehimpulsoperators zeigt man unter Nutzung des fundamentalen Kommutators (III.27) die folgenden Vertauschungsrelationen

$$\left[\hat{L}_i, \hat{x}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}\hat{x}_k \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}, \tag{V.40a}$$

und

$$\left[\hat{L}_i, \hat{p}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}\hat{p}_k \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}. \tag{V.40b}$$

Daraus folgert man den Kommutator zweier Komponenten des Bahndrehimpulsoperators

$$\boxed{\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}.} \tag{V.41}$$

Diese Vertauschungsrelation wird im nächsten Paragraphen zu Nutze gemacht, um die möglichen Eigenwerte und -zustände des Bahndrehimpulsoperators zu bestimmen.

V.3.3 Spektrum der Generatoren von Drehungen

Die Form des Kommutators (V.41) der Komponenten $\hat{L}_j$ des Bahndrehimpulsoperators ist die gleiche wie für die drei 3×3-Matrizen $\hbar\Sigma_j$ in § V.3.1, Gl. (V.34). Die drei Spin-Operatoren $\hat{S}_j$ des Spin-$\frac{1}{2}$-Systems, Gl. (II.32), genügen auch der gleichen Vertauschungsrelation, vgl. Gl. (II.34). Dabei wirken die Bahndrehimpulsoperatoren $\hat{L}_j$ auf den unendlich-dimensionalen Hilbert-Raum der quadratintegrablen (Wellen)Funktionen auf $\mathbb{R}^3$, die Matrizen $\hbar\Sigma_j$ operieren auf den dreidimensionalen reellen Raum der Ortsvektoren, und die $\hat{S}_j$ auf einen zweidimensionalen komplexen Vektorraum.

Allgemeiner kann man eine Dreiergruppe von hermiteschen Operatoren $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$ (oder äquivalent $\{\hat{J}_a\}$ mit $a = 1,2,3$) mit den Kommutatoren

$$\boxed{\left[\hat{J}_a, \hat{J}_b\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_{c=1}^{3}\epsilon_{abc}\hat{J}_c \quad \forall a,b \in \{1,2,3\}} \tag{V.42}$$

betrachten, und deren Eigenwerte und Eigenzustände suchen. Die Vertauschungsrelation (V.42) wird oft *Lie-Algebra(-Relation)* der Drehgruppe — genauer, von der Gruppe der Drehungen im dreidimensionalen euklidischen Raum — genannt, denn die $\{\hat{J}_a\}$ sind dann die Generatoren einer Darstellung jener Gruppe.

V.3.3 a Kommutierende Observablen

Mit Hilfe der drei Operatoren $\{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$ definiert man einen neuen Operator auf dem gleichen Hilbert-Raum durch

$$\boxed{\hat{\vec{J}}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2.} \tag{V.43}$$

Da jeder $\hat{J}_a$ hermitesch ist, besitzt $\hat{\vec{J}}^2$ auch diese Eigenschaft.

Dann prüft man einfach, dass die Vertauschungsrelationen (V.42) zum Kommutator

$$\boxed{\big[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_a\big] = \hat{0} \quad \forall a \in \{x, y, z\}} \tag{V.44}$$

führen.

Ausgehend von $\{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$ kann man einen Satz kommutierender Observablen, der aus $\hat{\vec{J}}^2$ und einer der Komponente $\hat{J}_a$ — traditionell $\hat{J}_z$ — besteht:

$$\big\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z\big\}. \tag{V.45}$$

Dieser Satz ist dann vollständig in folgenden Sinn: jede Funktion der Operatoren $\{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$, die mit beiden Observablen des Satzes (V.45) kommutiert, ist eigentlich Funktion von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$.

V.3.3 b Eigenzustände und Eigenwerte

Seien λ, m zwei reelle Quantenzahlen, die die gemeinsamen Eigenzustände des Satzes (V.45) kennzeichnen. Genauer sind die entsprechenden Eigenzustände $|\lambda, m\rangle$ durch die Gleichungen

$$\hat{\vec{J}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda, m\rangle \tag{V.46a}$$

$$\hat{J}_z|\lambda, m\rangle = m\hbar|\lambda, m\rangle \tag{V.46b}$$

mit $\||\lambda, m\rangle\| = 1$ definiert. Dabei wurden die jeweiligen Faktoren $\hbar^2$ und $\hbar$ eingeführt, damit λ und m dimensionslose Zahlen sind.

Nun folgt aus der Definition (V.43) und der Hermitizität der $\hat{J}_a$, dass λ nicht-negativ ist. Man kann nämlich einerseits dank Gl. (V.46a)

$$\langle\lambda, m|\hat{\vec{J}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda\hbar^2\langle\lambda, m|\lambda, m\rangle = \lambda\hbar^2$$

schreiben, während andererseits

$$\langle\lambda, m|\hat{\vec{J}}^2|\lambda, m\rangle = \sum_{a=x,y,z}\langle\lambda, m|\hat{J}_a^2|\lambda, m\rangle = \sum_{a=x,y,z}\langle\lambda, m|\hat{J}_a^\dagger\hat{J}_a|\lambda, m\rangle = \sum_{a=x,y,z}\big\|\hat{J}_a|\lambda, m\rangle\big\|^2 \geq 0$$

gilt: zusammen ergeben diese beiden Gleichungen $\lambda \geq 0$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit[33] kann man $\lambda \equiv j(j+1)$ mit $j \geq 0$ setzen. Ersetzt man dann die Notation $|\lambda, m\rangle$ durch $|j, m\rangle$, so werden die Beziehungen (V.46) zu

$$\boxed{\hat{\vec{J}}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle} \tag{V.47a}$$

$$\boxed{\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle} \tag{V.47b}$$

mit $j \in \mathbb{R}_+$ und $m \in \mathbb{R}$. Die Normierung der $\{|j, m\rangle\}$ und ihre Orthogonalität — sie sind ja Eigen-

[33] Die Funktion $j \mapsto j(j+1)$ ist nämlich bijektiv von $\mathbb{R}_+$ nach $\mathbb{R}_+$.

zustände von hermiteschen Operatoren mit unterschiedlichen Eigenwerten — lautet wiederum

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{jj'}\,\delta_{mm'}. \tag{V.48}$$

V.3.3 c Auf- und Absteigeoperatoren

Mit den Operatoren $\hat{J}_x$ und $\hat{J}_y$ definiert man zwei Operatoren durch

$$\boxed{\hat{J}_+ \equiv \hat{J}_x + \mathrm{i}\hat{J}_y \quad \text{und} \quad \hat{J}_- \equiv \hat{J}_x - \mathrm{i}\hat{J}_y.} \tag{V.49}$$

Da $\hat{J}_x$ und $\hat{J}_y$ hermitesch sind, sind die Operatoren $\hat{J}_\pm$ nicht hermitesch; eigentlich gelten

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_- \quad , \quad \hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+. \tag{V.50}$$

Aus Gl. (V.43) folgt, dass $\hat{J}_+$ und $\hat{J}_-$ mit $\hat{\vec{J}}^2$ kommutieren:

$$\big[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_+\big] = \big[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_-\big] = \hat{0}. \tag{V.51}$$

Dagegen kommutieren sie nicht mit $\hat{J}_z$. Genauer findet man

$$\big[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\big] = \big[\hat{J}_z, \hat{J}_x\big] \pm \mathrm{i}\big[\hat{J}_z, \hat{J}_y\big] = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_y \pm \mathrm{i}\big(-\mathrm{i}\hbar\hat{J}_x\big),$$

d.h.

$$\big[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\big] = \pm\hbar\hat{J}_\pm. \tag{V.52}$$

Anhand der Vertauschungsrelationen (V.51), (V.52) kann man Aussagen über die Vektoren $\hat{J}_+|j,m\rangle$ und $\hat{J}_-|j,m\rangle$ machen. Somit gilt einerseits

$$\hat{\vec{J}}^2\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hat{J}_\pm\hat{\vec{J}}^2|j,m\rangle = \hat{J}_\pm\big(j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle\big) = j(j+1)\hbar^2\hat{J}_\pm|j,m\rangle,$$

was zeigt, dass die Vektoren $\hat{J}_\pm|j,m\rangle$ Eigenvektoren von $\hat{\vec{J}}^2$ mit dem Eigenwert $j(j+1)\hbar^2$ sind, sofern sie sich vom Nullvektor $|\varnothing\rangle$ abweichen.

Andererseits führt Gl. (V.52) zu

$$\hat{J}_z\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \big[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\big]|j,m\rangle + \hat{J}_\pm\hat{J}_z|j,m\rangle = \pm\hbar\hat{J}_\pm|j,m\rangle + \hat{J}_\pm\hat{J}_z|j,m\rangle.$$

Dabei ist der zweite Term laut Gl. (V.47b) gleich $m\hbar\hat{J}_\pm|j,m\rangle$, woraus

$$\hat{J}_z\hat{J}_\pm|j,m\rangle = (m\pm 1)\hbar\hat{J}_\pm|j,m\rangle \tag{V.53}$$

folgt: wenn er nicht der Nullvektor $|\varnothing\rangle$ ist, ist $\hat{J}_+|j,m\rangle$ bzw. $\hat{J}_-|j,m\rangle$ Eigenvektor von $\hat{J}_z$ mit dem Eigenwert $(m+1)\hbar$ bzw. $(m-1)\hbar$. Somit erhöht bzw. vermindert der Operator $\hat{J}_+$ bzw. $\hat{J}_-$ den mit $\hat{J}_z$ assoziierten Eigenwert um eine Einheit von $\hbar$, was die Bezeichnung *Aufsteige-* bzw. *Absteigeoperator* begründet.

Bemerkung: Der aufmerksamen Leserin wird klar sein, dass die Operatoren $\hat{S}_+$, $\hat{S}_-$ des § II.3.2 e Sonderfälle — auf einem Hilbert-Raum von Dimension 2 — der Operatoren $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ sind.

V.3.3 d Bestimmung der Eigenwerte von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$

Geometrisch ist bei einem dreidimensionalen Vektor $\vec{J} \in \mathbb{R}^3$ klar, dass bei festem Wert dessen Betrags $|\vec{J}|$ — oder äquivalent von $\vec{J}^2$ —, die Länge $|J_z|$ einer dessen Komponente beschränkt ist. Ähnlich wird bei gegebener Quantenzahl j — entsprechend dem Eigenwert $j(j+1)\hbar^2$ von $\hat{\vec{J}}^2$ — die Quantenzahl m, d.h. der Eigenwert $m\hbar$ von $\hat{J}_z$, beschränkt sein.

In der Tat soll das Betragsquadrat

$$\|\hat{J}_\pm|\lambda,m\rangle\|^2 = \langle j,m|\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm|j,m\rangle$$

nicht-negativ sein, wobei die hermitesche Konjugationen (V.50) benutzt wurden. Dabei kann man das Produkt $\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm$ in der Form

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = \big(\hat{J}_x \mp \mathrm{i}\hat{J}_y\big)\big(\hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y\big) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm \mathrm{i}\big[\hat{J}_x, \hat{J}_y\big]$$

umschreiben. Unter Verwendung der Lie-Algebra-Beziehung (V.42) gilt noch

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm \mathrm{i}\big(\mathrm{i}\hbar\hat{J}_z\big) = \hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar\hat{J}_z.$$

Für das gesuchte Matrixelement $\langle j,m|\,\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm\,|j,m\rangle$ ergibt sich

$$\langle j,m|\,\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm\,|j,m\rangle = \langle j,m|\,\hat{\vec{J}}^2\,|j,m\rangle - \langle j,m|\,\hat{J}_z^2\,|j,m\rangle \mp \hbar\langle j,m|\,\hat{J}_z\,|j,m\rangle.$$

Jedes Matrixelement auf der rechten Seite lässt sich mithilfe der Relationen (V.47) und der Normierung des Eigenzustands $|j,m\rangle$ berechnen:

$$\langle j,m|\,\hat{\vec{J}}^2\,|j,m\rangle - \langle j,m|\,\hat{J}_z^2\,|j,m\rangle \mp \hbar\langle j,m|\,\hat{J}_z\,|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2 = \big[j(j+1) - m(m\pm 1)\big]\hbar^2.$$

Insgesamt gilt schließlich

$$\|\hat{J}_\pm|\lambda,m\rangle\|^2 = \big[j(j+1) - m(m\pm 1)\big]\hbar^2. \tag{V.54}$$

Damit der Term auf der rechten Seite nicht-negativ ist, soll $|m| \leq j$ gelten, wobei $j \in \mathbb{R}_+$ schon gezeigt wurde.

Dazu ist falls $m+1 \leq j$ bzw. $-j \leq m-1$ der Vektor $\hat{J}_+|j,m\rangle$ bzw. $\hat{J}_-|j,m\rangle$ nicht der Nullvektor $|\varnothing\rangle$, weil seine Norm nicht verschwindet: laut der Gl. (V.53) ist er dann proportional zum Eigenzustand $|j,m+1\rangle$ bzw. $|j,m-1\rangle$. Genauer gelten, da $|j,m\rangle$ und $|j,m\pm 1\rangle$ auf 1 normiert sind

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,\hbar|j,m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\hbar|j,m+1\rangle \tag{V.55a}$$

und

$$\hat{J}_-|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,\hbar|j,m-1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\hbar|j,m-1\rangle. \tag{V.55b}$$

Demgegenüber zeigt Gl. (V.54) auch, dass wenn der Eigenwert $m=j$ bzw. $m=-j$ existiert, gilt

$$\hat{J}_+|j,j\rangle = |\varnothing\rangle \quad \text{bzw.} \quad \hat{J}_-|j,-j\rangle = |\varnothing\rangle. \tag{V.56}$$

Sei nun $m_{\max}$ der maximale Wert von m bei gegebener j, der dank der Bedingung $|m| \geq j$ existiert. Dann ist definitionsgemäß $(m_{\max}+1)\hbar$ nicht Eigenwert von $\hat{J}_z$, d.h. — dank Gl. (V.53) mit dem Aufsteigeoperator — $\hat{J}_+|j,m_{\max}\rangle = |\varnothing\rangle$. Dann muss $m_{\max}$ gleich j sein und der Eigenzustand $|j,j\rangle$ existiert.[34] Ebenso muss der minimale Wert von m genau $-j$ sein und der Eigenzustand $|j,-j\rangle$ existiert.[34]

Fängt man jetzt mit dem Eigenzustand $|j,j\rangle$ an und wendet man den Absteigeoperator $\hat{J}_-$ mehrmals, so kommt für jede $n \in \mathbb{N}$

$$\big(\hat{J}_-\big)^n|j,j\rangle = C_n|j,j-n\rangle,$$

wobei sich die Proportionalitätskonstante rekursiv unter Anwendung der Gl. (V.55b) bestimmen lässt. Damit die Reihenfolge der Quantenzahlen $m = j-n$ von unten beschränkt bleibt, muss irgendwann $j-n$ die untere Schranke $-j$ sein, was $2j = n$ ergibt, d.h.

$$2j \in \mathbb{N}.$$

Anders gesagt muss die Quantenzahl j ganz- oder halbzahlig sein. Dann nimmt die andere Quantenzahl m alle Werte zwischen $-j$ und j in Einheiten von 1 an, entsprechend $2j+1$ unterschiedlichen Werten.

[34] Das heißt $|j,j\rangle \neq |\varnothing\rangle$ bzw. $|j,-j\rangle \neq |\varnothing\rangle$.

Bemerkung: In den Gl. (V.55) wurde stillschweigend die relative Phase der Eigenzustände $|j,m\rangle$ und $|j,m\pm 1\rangle$ gewählt, und zwar in Übereinstimmung mit der in der Quantenmechanik üblichen sog. *Condon*[(ad)]*–Shortley*[(ae)]*-Phasenkonvention*.

V.3.3 e Zusammenfassung: Eigenelemente eines Drehimpulsoperators

In den vorigen Paragraphen haben wir das folgende Ergebnis bewiesen:

Seien $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$ drei hermitesche Operatoren eines Hilbert-Raums $\mathscr{H}$, welche der Lie-Algebra-Relation

$$\big[\hat{J}_a, \hat{J}_b\big] = \mathrm{i}\hbar \sum_{c=1}^{3} \epsilon_{abc}\hat{J}_c \quad \forall a,b \in \{1,2,3\}$$

der Drehgruppe genügen. Dann sind die Operatoren $\hat{\vec{J}}^{\,2}$ und $\hat{J}_z$ gleichzeitig diagonalisierbar mit (V.57)

$$\hat{\vec{J}}^{\,2}|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \quad \textit{und} \quad \hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$$

wobei die Quantenzahlen j und m durch

$$j \in \{0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots\} \ \textit{und}\ m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$$

gegeben sind.

[(ad)] E. U. Condon, 1902–1974 [(ae)] G. H. Shortley, 1910–??